سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
مطالعه نظری جذب مولکولهای H2 ,O2 بر روی نانوخوشه های دوفلزی غیرمسطح (AumPd5-m m=2,3)

محل انتشار:
پنجمین کنفرانس ملی پژوهش های نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 15

نویسندگان:
عبدالحکیم پنق - *گروه شیمی، دانشکده علوم ، دانشگاه فرهنگیان، تهران*

علیرضا حنفی - *گروه شیمی ،دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی، قائمشهر، ایران*

مهدی قائمی - *گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه گلستان، گرگان*

سپیده سدنی - *گروه شیمی ،دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی، گرگان، ایران*

خلاصه مقاله:
در این پروژه جذب مولکولهای H2 وO2 بر روی نانو خوشه های دوفلزی غیر مسطح Au2Pd3و Au3Pd2 بطور نظری و با نظریه تابعیت چگالی مطالعه و بررسی شد. نتایج نشان داد که جذب این مولکولها در بعضی از ساختارها بسیار قوی (744/44 kcal/mol) بوده بطوری که پیوند کوالانسی مولکولهای H2 و O2 شکسته شده و بصورت اتمی جذب شده اند. در سایر خوشه ها جذب ضعیف بوده (0/02 kcal/mol) که در دمای معمولی عملا جذب صورت نمی گیرد. توزیع فضایی اوربیتالهای HOMO وLUMO نشان داد که در HOMO اتمهای Au سهم کمتری و درLUMO اتمهای Au سهم بیشتری نسبت به اتمهای پالادیوم، اکسیژن و هیدروژن دارند.

کلمات کلیدی:
خوشه های فلزی، انرژی برهمکنش، جذب سطحی، نظریه تابعیت چگالی،اوربیتالهای HOMO و، Au2Pd3، LUMO Au3Pd2

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/909915